

不同产地杜仲叶中氨基酸的化学计量分析

周利兵, 蒋才云, 蓝峻峰 (广西科技师范学院, 广西来宾 546199)

摘要 综合评价不同产地杜仲叶中氨基酸含量, 采用因子分析和聚类分析方法对不同产地杜仲叶中的氨基酸含量进行分析, 找出了杜仲叶中丙氨酸、甘氨酸、缬氨酸、亮氨酸、异亮氨酸、脯氨酸、丝氨酸、苏氨酸、蛋氨酸、天冬氨酸、谷氨酸、苯丙氨酸、赖氨酸、组氨酸、酪氨酸 15 种氨基酸之间的关系。运用化学计量方法, 结合 MATLAB 2016 软件, 对杜仲叶中氨基酸和生物活性进行研究。在因子分析和聚类分析的基础上, 构建一个评价中药质量的化学计量模型, 这些研究表明杜仲叶不仅具有很强的保健作用, 而且具有很高的药用价值。

关键词 杜仲叶; 氨基酸; 因子分析; 聚类分析; 化学计量

中图分类号 R284 文献标识码 A

文章编号 0517-6611(2020)19-0180-02

doi:10.3969/j.issn.0517-6611.2020.19.047



开放科学(资源服务)标识码(OSID):

Stoichiometric Analysis of Amino Acids in *Eucommia ulmoides* Leaves from Different Habitats

ZHOU Li-bing, JIANG Cai-yun, LAN Jun-feng (Guangxi Science & Technology Normal University, Laibin, Guangxi 546119)

Abstract The objective of this study was to comprehensively evaluate 15 kinds of amino acids in *Eucommia ulmoides* leaves from different habitats. The factor and cluster analysis method was used to analyze the data of amino acids in *Eucommia ulmoides* leaves from different habitats and find out the relationship between 15 kinds of amino acids including alanine, glycine, valine, leucine, isoleucine, proline, serine, threonine, methionine, aspartic acid, glutamic acid, phenylalanine, lysine, histidine, tyrosine. Using MATLAB 2016 software, the factor and cluster analysis research was made on the relationship between amino acids and biological activities in *Eucommia ulmoides* leaves. On the basis of factor and cluster analysis, a stoichiometric model was established for quality estimation of traditional Chinese medicine. These studies show that *Eucommia ulmoides* leaves not only have a very strong role at the health-care aspect, but also have high medicinal value.

Key words *Eucommia ulmoides* leaves; Amino acids; Factor analysis; Cluster analysis; Stoichiometry

杜仲叶主要产于湖南、陕西、四川、贵州、云南等地。《中药大辞典》记载:“杜仲叶具有镇静、镇痛、补肝肾、强精骨、提高免疫力、延缓衰老等功效。”^[1]《本草纲目》记载:“杜仲,能入肝补肾,补中益精气,坚筋骨,强志,治肾虚腰痛,久服,轻身耐老。”由于我国杜仲叶资源分布广泛,导致全国各地杜仲叶的品质参差不齐。因此,科学评价杜仲叶具有非常重要的意义。笔者采用因子分析和聚类分析方法,对不同产地杜仲叶中氨基酸含量数据进行了综合分析,对杜仲叶中氨基酸和生物活性进行科学研究,为合理开发不同产地杜仲资源以及氨基酸和杜仲叶在医疗保健方面应用提供参考。

1 材料与方

1.1 材料来源 选取湖北恩施、云南昆明、湖南常德、重庆长寿 4 个不同产地杜仲叶中丙氨酸(X_1)、甘氨酸(X_2)、缬氨酸(X_3)、亮氨酸(X_4)、异亮氨酸(X_5)、脯氨酸(X_6)、丝氨酸(X_7)、苏氨酸(X_8)、蛋氨酸(X_9)、天冬氨酸(X_{10})、谷氨酸(X_{11})、苯丙氨酸(X_{12})、赖氨酸(X_{13})、组氨酸(X_{14})、酪氨酸(X_{15}) 15 种氨基酸作为分析样本,原始数据来自文献[2]。

1.2 研究方法

1.2.1 因子分析。因子分析法是通过把原始数据压缩为少数的几个因子来综合反映全部因子的大部分信息的降维方法,这些压缩后的新变量彼此间消除了多重共线性、互不相关,所包含的信息量占原始信息的 85% 以上,这些新变量分析本质问题可信度很高^[3]。

1.2.2 聚类分析。聚类分析是对研究对象进行分类,把所有的个案归类在不同的类中,使同一类中个体有较大的相似

性,不同类中个体有较大的差异。

1.3 数据处理 应用 MATLAB 2016 软件对数据进行因子分析。提取主因子后,将主因子数据使用层次聚类方法进行分析。

2 结果与分析

2.1 因子分析

2.1.1 原始数据标准化。原始数据 z -score 标准化,即对同一变量减去其均值,再除以标准差,以消除原始数据之间的量纲影响,使标准化后的数据具备可比性^[4-7]。标准化处理后数据如表 1 所示。

表 1 原始数据经标准化后的数据

Table 1 The standardized data of raw data

样本 Sample	湖北恩施 Enshi, Hubei	云南昆明 Kunming, Yunnan	湖南常德 Changde, Hunan	重庆长寿 Changshou, Chongqing
X_1	1.432 985	-0.098 570	-0.514 720	-0.819 695
X_2	-0.605 527	1.238 578	0.353 879	-0.986 930
X_3	1.466 700	-0.198 552	-0.582 746	-0.685 402
X_4	1.480 898	-0.289 575	-0.513 615	-0.685 402
X_5	1.461 380	-0.180 303	-0.565 444	-0.715 634
X_6	0.392 267	1.158 158	-0.386 053	-1.164 372
X_7	1.354 785	0.042 159	-0.392 648	-1.004 295
X_8	1.428 648	-0.072 569	-0.547 228	-0.808 851
X_9	1.401 699	-0.064 784	-0.406 375	-0.930 539
X_{10}	1.371 387	0.023 811	-0.427 931	-0.967 267
X_{11}	1.414 524	-0.052 871	-0.494 713	-0.866 940
X_{12}	1.440 333	-0.138 864	-0.478 621	-0.822 848
X_{13}	-1.004 912	1.206 506	-0.607 835	0.406 241
X_{14}	-0.490 847	1.491 980	-0.626 923	-0.374 210
X_{15}	0.777 394	0.772 861	-0.228 912	-1.321 342

作者简介 周利兵(1978—),男,江苏宿迁人,教授,从事计算机化学、计量学和统计学多学科交叉融合研究。

收稿日期 2019-10-08; **修回日期** 2020-04-08

用 MATLAB 2016 进行因子分析,得到不同产地(湖北恩施、云南昆明、湖南常德、重庆长寿)杜仲叶中氨基酸的相关

系数矩阵特征根和方差贡献率(表2)。由表2可知,前2个主因子累计贡献率达到96.328%,前2个主因子的特征值($\lambda > 1$)较大且连线较陡峭,即前2个主因子对解释变量的贡献最大,提取前2个主因子最合适,它代表了湖北恩施、云南昆明、湖南常德、重庆长寿杜仲叶中15种氨基酸96.328%的信息。

表2 相关系数的特征根和方差贡献率

Table 2 Characteristic root of the correlation coefficient and the variance contribution rate

主因子 Main factor	特征根 Characteristic root	贡献率 Contribution rate//%	累计贡献率 Cumulative contribution rate//%
1	11.100	73.999	73.999
2	3.349	22.329	96.328
3	0.551	3.671	99.999
⋮	⋮	⋮	⋮

2.1.2 因子旋转。旋转后的因子载荷阵如表3所示。由表3可知,第1主因子 F_1 主要包含原变量丙氨酸 X_1 、缬氨酸 X_3 、亮氨酸 X_4 、异亮氨酸 X_5 、丝氨酸 X_7 、苏氨酸 X_8 、蛋氨酸 X_9 、天冬氨酸 X_{10} 、谷氨酸 X_{11} 、苯丙氨酸 X_{12} 、酪氨酸 X_{15} 人体必需的氨基酸信息。第2主因子 F_2 主要包含原变量甘氨酸 X_2 、脯氨酸 X_6 、赖氨酸 X_{13} 、组氨酸 X_{14} 的信息。

表3 旋转后的因子载荷阵

Table 3 Rotated component matrix

样本 Sample	因子1 Factor 1	因子2 Factor 2
X_1	0.998	-0.023
X_2	-0.077	0.910
X_3	0.987	-0.104
X_4	0.983	-0.159
X_5	0.990	-0.088
X_6	0.557	0.828
X_7	0.994	0.092
X_8	0.997	-0.009
X_9	0.999	0.015
X_{10}	0.997	0.075
X_{11}	0.999	0.012
X_{12}	0.998	-0.046
X_{13}	-0.538	0.706
X_{14}	-0.068	0.958
X_{15}	0.773	0.602

2.1.3 计算因子得分。因子得分和综合因子得分完全由MATLAB 2016专业软件编程程序自动运行得到,见表4。由表4可知,不同产地杜仲叶中氨基酸含量从高到低依次为湖北恩施、云南昆明、湖南常德、重庆长寿。

2.2 聚类分析 聚类分析是数理统计的一种方法,先对原始数据进行标准化处理,然后用2个主因子聚类的定量分析方法对湖北恩施、云南昆明、湖南常德、重庆长寿杜仲叶中氨基酸进行综合评价并分类。该研究采用主因子聚类分析,在

方法上采用欧氏距离测量,每两个样本间用 Average linkage 法连结,按顺序作图得图1。

表4 因子和综合因子分值

Table 4 Scores of factors and comprehensive factors

产地 Habitats	F_1	F_2	F	排名 Rank
湖北恩施 Enshi, Hubei	1.414 6	-0.464 6	0.979 1	1
云南昆明 Kunming, Yunnan	-0.080 3	1.474 0	0.279 9	2
湖南常德 Changde, Hunan	-0.441 1	-0.278 7	-0.403 4	3
重庆长寿 Changshou, Chongqing	-0.893 2	-0.730 7	-0.855 6	4

由图1可知,样本层次聚类分析聚成3类时,湖北恩施杜仲叶是一类,且含有的氨基酸在所有的样品中最高;湖南常德和重庆长寿杜仲叶是一类,且含有的氨基酸在所有的样品中最低;云南昆明杜仲叶为一类,且含有的氨基酸在所有的样品中占中间。这与因子分析的结果一致,在因子分析的基础上对不同产地杜仲叶中氨基酸进行聚类分类识别是可行的,所得结论客观、可信、有说服力。

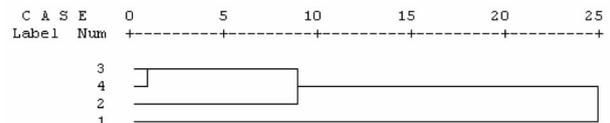


图1 层次聚类分析的树形图

Fig. 1 The tree diagram of hierarchical clustering analysis

3 小结

应用化学计量学方法^[8-10]对不同产地(湖北恩施、云南昆明、湖南常德、重庆长寿)杜仲叶中氨基酸进行综合分析,找出了不同产地杜仲叶中氨基酸和生物活性之间的关系,从杜仲叶中氨基酸含量看,湖北恩施和云南昆明杜仲叶的品质较好,湖南常德和重庆长寿杜仲叶质量较差。这些研究为不同产地杜仲叶和氨基酸在医疗保健方面应用提供理论依据和科学指导。

参考文献

- [1] 南京中医药大学. 中药大辞典[M]. 2版. 上海:上海科学技术出版社, 2006:1518-1519.
- [2] 周芳,刘韶,邓梦如,等. GC-MS/SIM法测定不同产地杜仲叶中的氨基酸[J]. 中南药学, 2012, 10(4):257-260.
- [3] 刘先国,周利兵. 因子分析法在体育测量中的应用研究[J]. 科技创新导报, 2011(4):251,253.
- [4] 牛岩,魏雨露,刘思琪. 数据标准化方法对SVM数据预测结果的影响研究[J]. 西部大开发(土地开发工程研究), 2020, 5(4):18-23.
- [5] 徐亦虹,丁珊妮,刘晓娜,等. 护理决策支持系统的局限性及对策[J]. 中华护理杂志, 2020, 55(3):405-409.
- [6] 张戈. 课程推荐预测模型中的数据预处理方法研究[J]. 中国新通信, 2019, 21(19):185.
- [7] 王首绪,谭潇洋. 高速公路大标段项目施工阶段造价影响因素及对策研究[J]. 公路与汽运, 2019(2):157-160.
- [8] 赵胜男,姚建伶,韩笑,等. 基于化学计量学优选不同制法山楂叶提取物[J]. 中成药, 2019, 41(10):2522-2525.
- [9] 聂晶,张永志,赵明,等. 山东茶叶轻稳定同位素和矿物元素特征与产地识别化学计量学分析[J]. 核农学报, 2019, 33(11):2237-2245.
- [10] 董坤园,于澎,熊金路,等. 基于高效液相色谱图谱结合化学计量学的红参指纹图谱研究[J]. 食品安全质量检测学报, 2019, 10(21):7316-7321.